Otimização de Processos (COQ897)

Prof. Argimiro R. Secchi

Segunda Lista de Exercícios - 2020

José Rodrigues Torraca Neto

4) A engenheira Fiona, responsável pela operação da Unidade de Extração por Solvente (UES) de uma indústria química, recebeu a incumbência de encontrar condições operacionais que fossem lucrativas para a UES para evitar o seu desligamento. A avaliação econômica realizada pela Eng. Fiona resultou na seguinte função lucro:

$$L(oldsymbol{x}) = a - rac{b}{x_1} - cx_2 - drac{x_1}{x_2}$$

, em que x_1 e x_2 são as razões mássicas do produto que deixam cada estágio de extração na corrente rafinada,

com
$$x_1 \leq 0,02$$
 e $x_2 \leq x_1$,

e a=129, 93, b=0, 5, c=4000, d=25 são constantes.

A condição de operação atual é dada por: $x_1=0,015$ e $x_2=0,001$.

- (a) Qual é o valor da função lucro na condição atual?
- (b) Qual a condição de máximo lucro encontrada pela Eng. Fiona e o valor da função lucro nessa nova condição, sabendo que a solução foi irrestrita?
- (c) Mostre que a nova condição é realmente um ponto de máximo;
- (d) Após operar vários meses nessa nova condição, a falta de solvente no mercado aumentou em quatro vezes o seu preço, modificando as constantes da função lucro para a=279,72,b=2,0,c=4000,d=100. Se a planta continuasse a operar nas mesmas condições encontradas em (b), qual seria o valor da função lucro? Qual foi a decisão tomada pela Eng. Fiona nessa nova condição do mercado? Por quê?

▼ Solução:

(a) O problema se resume a encontrar o valor da função lucro:

$$L(oldsymbol{x}) = a - rac{b}{x_1} - cx_2 - drac{x_1}{x_2}$$

, com as constantes: a = 129, 93, b = 0, 5, c = 4000, d = 25

e impondo:

$$x_1=0,015$$
 e $x_2=0,001$

#Definindo a função lucro:

```
def f(x1, x2, a=129.93, b=0.5, c=4000, d=25):
return a-(b/x1)-(c*x2)-(d*(x1/x2))
```

#Impondo x1 e x2:

result = f(0.015,0.001)

print(result)

-282.40333333333333

Resposta: (a) O valor da função lucro atual é L(x)=-282,4.

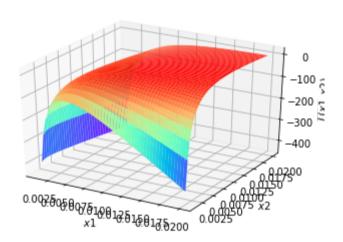
(b) O problema consiste em encontrar a condição de máximo lucro $(x_1,x_2)^{max}$ e o valor da função lucro nesta condição:

$$L(oldsymbol{x}) = a - rac{b}{x_1} - cx_2 - drac{x_1}{x_2}$$

```
, com as constantes: a=129, 93, b=0, 5, c=4000, d=25
```

e sem restrições (mas impondo limites para $x_1 \ e \ x_2$ como valores positivos e menores ou iguais a 1, para serem fisicamente consistentes, já que são razões mássicas).

```
import numpy as np
import scipy.integrate
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline
from scipy.optimize import minimize
#Verificando a forma da superfície:
from matplotlib import cm
x1 = np.linspace(1E-3, 2E-2, 50)
x2 = np.linspace(1E-3, 2E-2, 50)
X, Y = np.meshgrid(x1, x2)
Z = 129.93 - 0.5/X - 4000*Y - 25*(X/Y)
fig, ax = plt.subplots(subplot_kw={'projection': '3d'})
ax.plot_surface(X, Y, Z, cmap=cm.rainbow)
ax.set_xlabel('$x1$')
ax.set_ylabel('$x2$')
ax.set_zlabel('$L(x1,x2)$');
```



```
## Conceitualmente, a maximização é análoga à minimização: para encontrar
#o máximo da função f, basta encontrar o mínimo de -f.
## Para efetuar a minimização, utilizaremos a função scipy.optimize.minimize.
## Seu uso tem a seguinte sintaxe:
#scipy.optimize.minimize (fun, x0)
#sendo os argumentos:
#fun: função que deve ser minimizada, definida previamente (f);
#x0: estimativa inicial do mínimo.
## A função minimize também fornece uma interface para vários algoritmos
#de minimização com restrição. Como exemplo, o algoritmo de otimização
#Sequential Least SQuares Programming (SLSQP) será considerado aqui.
## Esse algoritmo permite lidar com problemas de otimização com restrições
#de igualdade (eq) e desigualdade (ineq).
## Definindo a função objetivo - lucro (func):
def func(x, a=129.93, b=0.5, c=4000, d=25, sign=-1.0):
    return sign*(a - b/x[0] - c*x[1] - d*x[0]/x[1])
## Definindo a função das derivadas de f em relação a x1 e x2 (func_deriv):
def func_deriv(x, a=129.93, b=0.5, c=4000, d=25, sign=-1.0):
    dfdx0 = sign*(0 + b/(x[0])**2 + 0 - d/x[1])
    dfdx1 = sign*(0 + 0 - c + d*x[0]/(x[1])**2)
    return np.array([ dfdx0, dfdx1 ])
```

```
#o parâmetro de sinal (sign) é introduzido para multiplicar a função objetivo
#(e sua derivada) por -1, para realizar uma maximização.
## Definindo as condições de contorno (limites físicos do problema:
\# 0 < x1 <= 1; 0 < x2 <= 1) como
# um objeto 'bounds' do scipy:
from scipy.optimize import Bounds
bounds = Bounds([1E-9, 1E-9], [1.0, 1.0])
#Tivemos que impor [1E-9, 1E-9] e não [0, 0] porque senão o método
#acaba fazendo uma divisão por zero.
## (OPCIONAL) Em seguida, as restrições são definidas como uma sequência de
#dicionários (Python), com as teclas type, fun e jac (default x \ge 0).
## Definindo as restrições de desigualdade x1 <= 0,02, x2 <= x1:
ineq_cons = {'type': 'ineq',
             'fun' : lambda x: np.array([0.02 - x[0],
                                         x[0] - x[1]),
             'jac' : lambda x: np.array([[-1.0, 0.0],
                                         [1.0, -1.0]])}
#Em Python, existe um conceito bastante poderoso e integrado à linguagem
#que é chamado de expressão LAMBDA ou forma lambda.
#O conceito em si é bastante simples:
#consiste em uma função que é atribuida a um objeto.
#Por conter a palavra reservada lambda o objeto se comportará como uma função,
#e podemos usar funções anônimas dentro de outras funções.
#Agora, pode ser feita uma otimização sem restrições
#(apenas com os limites físicos 'bounds'):
x0 = np.array([0.99, 0.1])
res = minimize(func, x0, jac=func_deriv,
               method='SLSQP', options={'ftol': 1e-9, 'disp': True},
               bounds = bounds)
print(res.x)
     Optimization terminated successfully.
                                              (Exit mode 0)
                 Current function value: -19.409055040270935
                 Iterations: 31
                 Function evaluations: 55
                 Gradient evaluations: 27
     [0.01357208 0.00921004]
#E a otimização com restrições (OPCIONAL - constraints = ineq_cons):
x0 = np.array([0.5, 0.5])
res = minimize(func, x0, jac=func_deriv, constraints=ineq_cons,
               method='SLSQP', options={'ftol': 1e-9, 'disp': True},
               bounds = bounds)
print(res.x)
     Optimization terminated successfully.
                                              (Exit mode 0)
                 Current function value: -19.409055040739943
                 Iterations: 14
                 Function evaluations: 21
                 Gradient evaluations: 14
     [0.01357208 0.00921008]
#Resultado em notação científica:
scientific_notation1 = "{:.2e}".format(res.x[0])
```

#Observe que, uma vez que 'minimize' apenas minimiza funções,

Resposta: (b) A condição de máximo lucro é $(x_1; x_2)^{max} = (1, 36 \cdot 10^{-2}; 9, 21 \cdot 10^{-3})$ e o valor da função lucro nessa nova condição é L(x) = 19, 41.

(c) Podemos verificar se o ponto encontrado é um ponto de máximo, analisando a matriz Hessiana H(x):

Como já calculamos o jacobiano no item anterior, temos:

$$L(m{x}) = a - rac{b}{x_1} - cx_2 - drac{x_1}{x_2} \
abla L(x) = \left(egin{array}{c} rac{b}{x_1^2} - rac{d}{x_2} \ -c + drac{x_1}{x_2^2} \end{array}
ight)$$

Calculando a matriz Hessiana:

$$H(x) = egin{pmatrix} -rac{2b}{x_1^3} & +rac{d}{x_2^2} \ rac{d}{x_2^2} & -2drac{x_1}{x_2^3} \end{pmatrix}$$

Podemos analisar a matriz Hessiana diretamente no ponto ótimo $x^* = \left(\frac{1,36\cdot 10^{-2}}{9,21\cdot 10^{-3}}\right)$:

$$H(x^*) = \left(egin{array}{ccc} -400001 & 294722 \ 294722 & -868613 \end{array}
ight)$$

Como a matriz $H(x^*)$ é apenas simétrica, e não diagonal neste ponto, temos que calcular seus autovalores (λ) :

$$\lambda = \left(\begin{array}{c} -257796 \\ -1010818 \end{array}\right)$$

Resposta: (c) Como todos seus autovalores são negativos, a matriz $H(x^*)$ é negativa definida no ponto $x^* = \begin{pmatrix} 1, 36 \cdot 10^{-2} \\ 9, 21 \cdot 10^{-3} \end{pmatrix}$; o que

implica em um ponto de máximo local.

(c) Método alternativo: Apesar do Python não ser naturalmente uma linguagem de programação com métodos simbólicos, é possível importar uma biblioteca que utiliza métodos simbólicos (Sympy), e então calcular as matrizes do Jacobiano e Hessiana diretamente, quando os problemas são simples o suficiente:

A renderização de equações Sympy requer que o MathJax esteja disponível em cada saída de célula. A seguir temos uma função que fará isso acontecer:

```
from IPython.display import Math, HTML
def enable_sympy_in_cell():
  display(HTML("<script src='https://cdnjs.cloudflare.com/ajax/libs/"</pre>
                  "mathjax/2.7.3/latest.js?config=default'></script>"))
get_ipython().events.register('pre_run_cell', enable_sympy_in_cell)
from sympy import Function, hessian, Matrix, init_printing
from sympy.abc import x, y
init_printing
##Definindo a função L(x1,x2):
x1, x2, a, b, c, d = symbols('x1 x2 a b c d')
f = a-(b/x1)-(c*x2)-(d*(x1/x2))
                                                                        a-rac{b}{x_1}-cx_2-rac{dx_1}{x_2}
Matrix([f]).jacobian([x1, x2])
                                                                       \left[rac{b}{x_1^2}-rac{d}{x_2} -c+rac{dx_1}{x_2^2}
ight]
hessian(f, (x1,x2))
                                                                          egin{bmatrix} -rac{2b}{x_1^3} & rac{d}{x_2^2} \ rac{d}{x_2^2} & -rac{2d}{x_3^3}x_1 \end{bmatrix}
##Substituindo as constantes 'a,b,c,d' na função lucro original:
import sympy as sp
from sympy import *
import numpy as np
x1, x2 = sp.symbols('x1 x2', real=True)
f = 129.93 - (0.5/x1) - (4000*x2) - (25*(x1/x2))
F = sp.Matrix([f])
F
                                                                \left[ -rac{25x_1}{x_2} - 4000x_2 + 129.93 - rac{0.5}{x_1} 
ight]
##Calculando a função hessiana:
H = hessian(f, (x1,x2))
Η
##Calculando a função hessiana no ponto ótimo [0.01357208, 0.00921008]:
```

```
Hp = hessian(f, [x1,x2]).subs([(x1,0.01357208), (x2,0.00921008)])
```

```
\begin{bmatrix} -400000.714671238 & 294722.439673709 \\ 294722.439673709 & -868612.765371583 \end{bmatrix}
```

##Finalmente calculamos os autovalores de H no ponto ótimo:

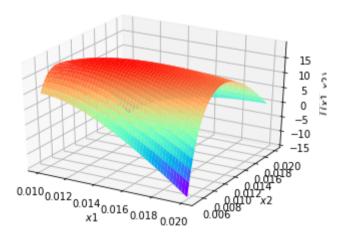
```
Hp.eigenvals()
```

```
\left\{-\frac{1268613480042821}{2000000000} - \frac{\sqrt{567042519850474875870526385749}}{2000000000} : 1, -\frac{1268613480042821}{2000000000} + \frac{\sqrt{567042519850474875870526385749}}{2000000000} : 1\right\}
```

Esses autovalores são negativos, e a notação :1, significa que possuem multiplicidade algébrica 1.

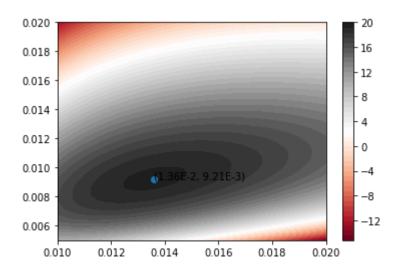
(c) Adicional: Também podemos demonstrar que o ponto encontrado é um ponto de máximo plotando o gráfico (superfície 3d) e curvas de níveis da função objetivo L(x):

```
import numpy as np
import scipy.integrate
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline
from scipy.optimize import minimize
#Verificando a forma da superfície:
from matplotlib import cm
x1 = np.linspace(1E-2, 2E-2, 50)
x2 = np.linspace(5E-3, 2E-2, 50)
X, Y = np.meshgrid(x1, x2)
Z = 129.93 - 0.5/X - 4000*Y - 25*(X/Y)
fig, ax = plt.subplots(subplot_kw={'projection': '3d'})
ax.plot_surface(X, Y, Z, cmap=cm.rainbow)
ax.set_xlabel('$x1$')
ax.set_ylabel('$x2$')
ax.set_zlabel('$L(x1,x2)$');
```



#Plotando superfície de contorno (com colorbar) - com ponto de máximo indicado:

```
plt.contourf(X, Y, Z, 50, cmap='RdGy')
plt.colorbar();
plt.scatter([1.36E-2], [9.21E-3])
plt.annotate("(1.36E-2, 9.21E-3)", (1.36E-2, 9.21E-3))
plt.show()
```



#Plotando superfície de contorno (com colorbar) - com labels:

```
contours = plt.contour(X, Y, Z, 5, colors='black')
plt.clabel(contours, inline=True, fontsize=8)
plt.imshow(Z, extent=[0.005, 0.025, 0.0025, 0.025], origin='lower',
           cmap='rainbow', alpha=0.5)
plt.colorbar();
      0.025
                                          15
      0.020
                                          - 10
      0.015
      0.010
                                           -10
      0.005
                                           -15
         0.005
               0.010
                      0.015
                             0.020
                                   0.025
#Plot superfície de contorno (padrão) - com labels:
fig, ax = plt.subplots()
CS = ax.contour(X, Y, Z, [10,15,18,19, 19.4], cmap='jet')
ax.clabel(CS, inline=1, fontsize=10)
ax.set_title('Superfície de contorno com labels')
ax.set_xlabel('$x1$')
ax.set_ylabel('$x2$')
     Text(0, 0.5, '$x2$')
                      Superfície de contorno com labels
        0.020
        0.018
        0.016
                                        10.000
        0.014
        0.012
        0.010
        0.008
        0.006
                          10.000
                                                0.018
           0.010
                    0.012
                             0.014
                                       0.016
                                                         0.020
                                   x1
(d) Temos a mesma forma da função objetivo L(x), mas com constantes diferentes:
a = 279,72; b = 2,0; c = 4000; d = 100.
#Valor da nova função objetivo (lucro) no ponto máximo da letra(b):
#Lembrar de alterar o sinal novamente para sign=1.0:
def func(x, a=279.72, b=2.0, c=4000, d=100, sign=1.0):
    return sign*(a - b/x[0] - c*x[1] - d*x[0]/x[1])
result = func([1.36E-2, 9.21E-3])
print(result)
     -51.844404419748344
## Vamos fazer uma maximização para a nova função objetivo:
def func(x, a=279.72, b=2.0, c=4000, d=100, sign=-1.0):
    return sign*(a - b/x[0] - c*x[1] - d*x[0]/x[1])
## Definindo a função das derivadas de f em relação a x1 e x2 (func_deriv):
def func_deriv(x, a=279.72, b=2.0, c=4000, d=100, sign=-1.0):
    dfdx0 = sign*(0 + b/(x[0])**2 + 0 - d/x[1])
    dfdx1 = sign*(0 + 0 - c + d*x[0]/(x[1])**2)
    return np.array([ dfdx0, dfdx1 ])
```

Definindo as condições de contorno:

```
from scipy.optimize import Bounds
bounds = Bounds([1E-9, 1E-9], [1.0, 1.0])
## Definindo as restrições de desigualdade x1 <= 0,02, x2 <= x1:
ineq_cons = {'type': 'ineq',
             'fun' : lambda x: np.array([0.02 - x[0],
                                        x[0] - x[1]),
             'jac' : lambda x: np.array([[-1.0, 0.0],
                                         [1.0, -1.0]])
#Agora, pode ser feita uma otimização sem restrições
#(apenas com os limites físicos 'bounds'):
x0 = np.array([0.5, 0.5])
res = minimize(func, x0, jac=func_deriv,
               method='SLSQP', options={'ftol': 1e-9, 'disp': True},
               bounds = bounds)
print(res.x)
     Optimization terminated successfully. (Exit mode 0)
                 Current function value: -1.2246699827823875
                 Iterations: 16
                 Function evaluations: 27
                 Gradient evaluations: 16
     [0.02154434 0.02320799]
#E a otimização com restrições (OPCIONAL - constraints = ineq_cons):
x0 = np.array([0.5, 0.5])
res = minimize(func, x0, jac=func_deriv, constraints=ineq_cons,
               method='SLSQP', options={'ftol': 1e-9, 'disp': True},
               bounds = bounds)
print(res.x)
     Optimization terminated successfully.
                                              (Exit mode 0)
                 Current function value: 0.2800000000520271
                 Iterations: 9
                 Function evaluations: 14
                 Gradient evaluations: 9
     [0.02 0.02]
#Valor da função objetivo (lucro) no ponto máximo (sem restrições):
#Lembrar de alterar o sinal novamente para sign=1.0:
def func(x, a=279.72, b=2.0, c=4000, d=100, sign=1.0):
    return sign*(a - b/x[0] - c*x[1] - d*x[0]/x[1])
result = func([2.15E-2, 2.32E-2])
print(result)
     1.2243303929431022
#Valor da função objetivo (lucro) no ponto máximo (com restrições):
#Lembrar de alterar o sinal novamente para sign=1.0:
def func(x, a=279.72, b=2.0, c=4000, d=100, sign=1.0):
    return sign*(a - b/x[0] - c*x[1] - d*x[0]/x[1])
result = func([2E-2, 2E-2])
print(result)
     -0.279999999999727
import numpy as np
import scipy.integrate
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline
from scipy.optimize import minimize
#Verificando a forma da superfície:
```

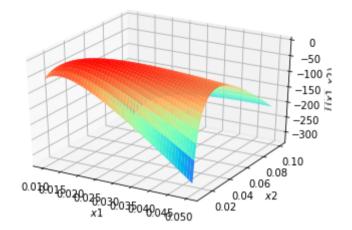
```
from matplotlib import cm

x1 = np.linspace(1E-2, 5E-2, 50)
x2 = np.linspace(1E-2, 1E-1, 50)
X, Y = np.meshgrid(x1, x2)

Z = 279.72 - 2.0/X - 4000*Y - 100*(X/Y)

fig, ax = plt.subplots(subplot_kw={'projection': '3d'})
ax.plot_surface(X, Y, Z, cmap=cm.rainbow)

ax.set_xlabel('$x1$')
ax.set_ylabel('$x2$')
```



Resposta: (d) O novo valor da função lucro na condição da letra (b) seria L(x)=-51,84.

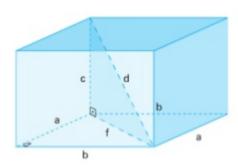
A Eng. Fiona tem 2 opções:

 $ax.set_zlabel('$L(x1,x2)$');$

- i) **Desligar a planta.** Porque considerando a nova função objetivo, obedecendo as restrições impostas $x_1 \le 0,02$ e $x_2 \le x_1$; o maior valor do lucro ainda seria negativo (-0,28), o que seria inviável economicamente.
- ii) Continuar operando com a planta, caso seja possível desrespeitar as restrições impostas $x_1 \le 0,02$ e $x_2 \le x_1$. Porque nesse caso (sem restrições), é possível obter um lucro positivo de 1,22; para $x=(2,15\cdot 10^{-2},2,32\cdot 10^{-2})$. Mesmo assim, esse valor do lucro parece ser muito baixo para ser viável economicamente.
- 5) Determine as dimensões do paralelepípedo, cuja diagonal tem um comprimento d, que apresenta o maior volume possível.

→ Solução:

O problema consiste em maximizar a função objetivo que representa o volume do paralelepípedo, com dimensões (a, b, c) e diagonal d:



$$d = \sqrt{a^2 + b^2 + c^2}$$

A função objetivo que representa o volume, em termos das dimensões (a, b, c) pode ser expressa como:

$$V(a,b,c) = a \cdot b \cdot c$$

Para expressar a diagonal d em relação às dimensões, podemos fazer algumas relações geométricas (ver figura - triângulo interior):

$$d^2 = c^2 + f^2 \ f^2 = a^2 + b^2 \ d^2 = c^2 + b^2 + a^2$$

Para definir uma restrição, podemos expressar a última equação em relação à uma das dimensões (c):

$$c=\sqrt{d^2-a^2-b^2}$$

Então, podemos reescrever o volume como:

$$V(a,b) = ab\sqrt{d^2 - a^2 - b^2}$$

Agora, precisamos maximizar V com as restrições (a,b>0) e $(a^2+b^2\leq d^2)$.

Podemos então encontrar os pontos críticos derivando V em relação à a e b:

$$egin{aligned} V_a(a,b) &= b\sqrt{d^2-a^2-b^2} - rac{a^2b}{\sqrt{d^2-a^2-b^2}} = rac{1}{\sqrt{d^2-a^2-b^2}}(d^2-2a^2-b^2)b, \ V_b(a,b) &= a\sqrt{d^2-a^2-b^2} - rac{ab^2}{\sqrt{d^2-a^2-b^2}} = rac{1}{\sqrt{d^2-a^2-b^2}}(d^2-a^2-2b^2)a. \end{aligned}$$

Lembrando que $a, b \neq 0$, como dito anteriormente, e igualando as 2 últimas equações a zero; teremos que as seguintes relações serão verdadeiras:

$$(d^2-2a^2-b^2)=0, \ (d^2-a^2-2b^2)=0$$

Reescrevendo a primeira equação como $b^2=d^2-2a^2$ e substituindo na segunda equação, temos:

$$egin{aligned} d^2 - a^2 - 2(d^2 - 2a^2) &= 0 \ 3a^2 &= d^2 \ a &= rac{d}{\sqrt{3}} \end{aligned}$$

Substituindo a na primeira equação, temos que $b=\frac{d}{\sqrt{3}}$

Substituindo a e b em $c=\sqrt{d^2-a^2-b^2}$, temos que $c=\frac{d}{\sqrt{3}}$.

Então, temos que o volume máximo é obtido quando:

$$a=b=c=rac{d}{\sqrt{3}}$$
 $V_{max}=\left(rac{d}{\sqrt{3}}
ight)^3=rac{d^3}{3\sqrt{3}}$

Resposta: (5) O volume máximo é dado por $V_{max}=rac{d^3}{3\sqrt{3}}$, com dimensões $a=b=c=rac{d}{\sqrt{3}}$.

- Solução alternativa:

O problema também pode ser resolvido por meio de multiplicadores de Lagrange:

Com
$$f(a,b,c) = abc; \ \ g(a,b,c) = a^2 + b^2 + c^2 - d^2 = 0$$

Então,

$$igtriangledown f(a,b,c) = \langle bc,ac,ab
angle \,, \
abla g(a,b,c) = \langle 2a,2b,2c
angle \,.$$

E as equações são:

$$bc = 2a\lambda, \ ac = 2b\lambda, \ ab = 2c\lambda.$$

Logo,

$$abc=2a^2\lambda=2b^2\lambda=2c^2\lambda$$
 ,

que obtemos ao multiplicar cada equação por a,b,c; respectivamente. Então, como a,b,c>0; temos que $\lambda=0$ ou a=b=c.

Se $\lambda=0,$ então a,b ou c=0; o que não pode ocorrer.

Então, devemos ter a=b=c; e, da equação de restrição, significa que:

$$a=b=c=rac{d}{\sqrt{3}}$$

E também temos novamente:

$$V_{max} = \left(rac{d}{\sqrt{3}}
ight)^3 = rac{d^3}{3\sqrt{3}}$$